



CH₂(X³B₁)分子的结构与解析势能函数

吕兵^{1,2}, 杨向东²

1. 贵州师范大学, 理学院, 贵州, 贵阳, 550001;
2. 四川大学, 原子与分子物理研究所, 四川, 成都, 610065

Structure and analytic potential energy function of the molecule CH₂

LÜ Bing^{1,2}, YANG Xiang-dong²

1. School of Science, Guizhou Normal University, Guiyang 550001, China;
2. Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China

- 摘要
- 参考文献
- 相关文章

全文: PDF (340 KB) HTML (KB) 输出: BibTeX | EndNote (RIS) 背景资料

摘要 运用密度泛函理论(DFT)的B3LYP方法在6-311++G**水平上,对基态CH₂分子的结构进行了优化计算,得到CH₂分子的稳定结构为C_{2v}构型,电子态为X³B₁,平衡核间距R_{CH}=0.1072nm、离解能D_e=8.034eV,用多体项展式理论推导了基态CH₂分子的解析势能函数,其等值势能图准确再现了基态CH₂分子的结构特征及其势阱深度与位置.

关键词: CH₂ Murrell-Sorbie函数 多体项展式理论 解析势能函数

Abstract: The density function(B3LYP) method has been used to optimize the possible ground-state structures of CH₂ molecule.The results show that the ground state of CH₂ molecule has C_{2v} symmetry and is in the X³B₁ state.The parameters of structure are R_{CH}=0.1072 nm,D_e=8.034 eV,respectively.The potential energy function of CH₂ has been derived from the many-body expansion theory.The potential energy function describes correctly the configuration and the dissociation energy of the ground-state CH₂ molecule.

Key words: CH₂ Murrell-Sorbie function many-body expansion theory potential energy function

收稿日期: 2008-02-15;

基金资助:国家自然科学基金资助项目(10574096);高等学校博士学科点专项科研基金资助项目(20050610010);贵州省教育厅自然科学基金资助项目(2005105)

引用本文:

吕兵,杨向东. CH₂(X³B₁)分子的结构与解析势能函数[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2008, 30(4): 376-380.

LÜ Bing,YANG Xiang-dong. Structure and analytic potential energy function of the molecule CH₂[J]. , 2008, 30(4): 376-380.

没有本文参考文献

没有找到本文相关文章

服务

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ E-mail Alert
- ▶ RSS

作者相关文章

- ▶ 吕兵
- ▶ 杨向东

版权所有 © 《云南大学学报(自然科学版)》编辑部

编辑出版: 云南大学学报编辑部 (昆明市翠湖北路2号, 650091)

电话: 0871-5033829(传真) 5031498 5031662 E-mail: yndxxb@ynu.edu.cn yndxxb@163.com